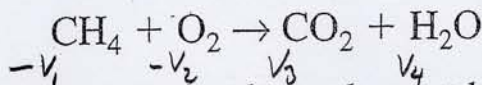


Suppose the reaction of interest is oxidation of methane ( $\text{CH}_4$ ) to  $\text{CO}_2$  and water, written as an unbalanced reaction as



There are three elements, so we write three element balance equations (numbering our compounds as 1 =  $\text{CH}_4$ , 2 =  $\text{O}_2$ , 3 =  $\text{CO}_2$ , 4 =  $\text{H}_2\text{O}$ ):

$$\text{C: } \nu_1 + \nu_3 = 0$$

$$\text{H: } 4\nu_1 + 2\nu_4 = 0$$

$$\text{O: } 2\nu_2 + 2\nu_3 + \nu_4 = 0$$

We write this set of equations in matrix form

$$\begin{array}{c} \text{C} \\ \text{H} \\ \text{O} \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \\ \nu_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Notice that each column in matrix  $A$  represents the chemical formula for one compound. For example, column 1 represents  $\text{C}_1\text{H}_4\text{O}_0$ , or  $\text{CH}_4$ . In other words,

Skall lösa  $A \cdot V = 0$  där  $A$  matrisen ovan.

Vi får:

$$V = \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \\ \nu_4 \end{pmatrix} = t \cdot \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \text{där } t \in \mathbb{R}$$

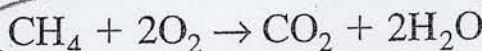
nollrummet

$$\begin{pmatrix} -1 \\ -2 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

bas för  
nollrummet

vilket ger

and the balanced equation is:



("minustecken" motsvarar "vänster om pilen", plusstecken höger)

### Exempel 5-3: Framtagning av oberoende reaktioner<sup>1</sup>

I en process för framställning ättiksyreanhydrid ((CH<sub>3</sub>CO)<sub>2</sub>O) utgår man från aceton ((CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO) och ättiksyra (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>). Som mellanprodukter och biprodukter förekommer keten (CH<sub>2</sub>CO), metan, kolmonoxid, eten och vätegas.

Ge förslag på en uppsättning oberoende reaktioner för processen

Rader: H, C, O

Kolonner: H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO, Eten, Keten, Ättiksyra, Aceton, Ättiksyreanhydrid

$$\alpha := \begin{bmatrix} 2 & 4 & 0 & 4 & 2 & 4 & 6 & 6 \\ 0 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 & 1 & 3 \end{bmatrix} = \underline{A}$$

Vi kan redan nu säga att rangen för  $\alpha$ -matrisen är 3.

nolldimensionen = dim. av lösningarna  $\underline{AX=0}$   
blir  $8-3=5$  (kolonnerna-rang) och  
bas för nollrummet är (tex) kolonnerna i

$$\sigma := \begin{bmatrix} 2 & 1 & -2 & 1 & -1 \\ -2 & -1 & 0 & -2 & -1 \\ 0 & -1 & -2 & -1 & -3 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Reaktionerna kan nu avläsas i  $\sigma$ -matrisen. Varje rad är en komponent och ordningen mellan komponenterna är densamma som komponenterna kommer som kolonner i  $\alpha$ -matrisen.

